

非线性 Schrödinger 方程组的精确解组

蒲利春 林宗兵 张雪峰 王本菊 姜毅 严天艳

(攀枝花学院数理教学部,攀枝花 617000)

(2005 年 6 月 9 日收到,2005 年 6 月 19 日收到修改稿)

运用 Maple 语言程序,在没有假设的条件下,得到了具有耦合特性的非线性 Schrödinger 方程组的行波精确解组及其约束条件方程,它们的表达式涵盖了所有的耦合解组与非耦合解组,具有任意性.耦合解组的算例函数及其特性分析,解释了 α 螺旋蛋白质螺旋链运动模型的行波孤立子解的耦合效应,揭示了增加、稳定和控制在蛋白质活性和功能的方向.文章的研究方法,为求解耦合的非线性微分方程组的行波精确解组探索了蹊径.

关键词:非线性 Schrödinger 方程组, Maple 语言,行波精确解组,算例函数及其特性

PACC: 0230, 0340K

1. 引言

20 世纪 70 年代, Davydov 提出了 α 螺旋蛋白质的一维分子链模型理论^[1], 并对孤立子产生及对生命生理功能影响进行了分析, 继后, Scott 在该领域作了理论和实验研究工作^[2]. 一维分子链模型理论的特征是: 用量子力学理论建立蛋白质分子的一维动力学模型, 设定系列近似条件导出蛋白质分子链的运动方程, 用反散射法求出一个稳定的孤立子解, 据此研究其能量, 从而对 ATP 水解所释放的能量以及动物肌肉收缩现象等做出解释. 文献^[3]提出了 α 螺旋蛋白质的螺旋链运动模型, 研究了螺旋链中非耦合的双孤立子解及其能量, 由于它的非耦合假设,

在本质上仍然是蛋白质一维动力学模型的单孤立子解^[3-6], 不能准确地反应螺旋链运动模型的耦合效应. 我们在研究非线性“loop”孤子方程确定解思想指导下^[7], 以具有耦合的非线性 Schrödinger 方程组为出发点, 运用 Maple 工具导出它的耦合行波精确解组, 通过算例函数及其特性分析, 讨论 α 螺旋蛋白质螺旋链运动模型的耦合特性.

2. 耦合的非线性微分方程组

文献^[6]作者设想: 氨基酸残基之间的联接为螺旋结构, 其内部振子也成螺旋结构, 在平衡状态下, 两者在整体上对应同一螺旋线. 据此导出了 α 螺旋蛋白质螺旋链运动模型方程组^[6].

$$\begin{cases} j\dot{\varphi}_1(x, t) = \left(\omega_0 - \frac{\omega_1^2}{2\omega_0}\right)\varphi_1(x, t) + \frac{\gamma_0(\chi_1 + \chi_2)}{\omega_0}\varphi_1(x, t)\frac{\partial R(x, t)}{\partial x} - \frac{\omega_1^2\gamma_0^2}{4\omega_0}\frac{\partial^2\varphi_1(x, t)}{\partial x^2} \\ j\dot{\varphi}_2(x, t) = \left(\omega_0 - \frac{\omega_1^2}{2\omega_0}\right)\varphi_2(x, t) + \frac{\gamma_0(\chi_1 + \chi_2)}{\omega_0}\varphi_2(x, t)\frac{\partial R(x, t)}{\partial x} - \frac{\omega_1^2\gamma_0^2}{4\omega_0}\frac{\partial^2\varphi_2(x, t)}{\partial x^2} \end{cases} \quad (1)$$

(1)式中, $\varphi_1(x, t), \varphi_2(x, t)$ 是 α 螺旋蛋白质螺旋链运动模型中氨基酸残基内部振子所对应的准粒子的波函数; $R(x, t)$ 为氨基酸残基振动坐标, M 是氨基酸残基质量; γ_0, β_0 分别是相邻氨基酸残基的距离和角距离, x_0 是螺旋线的螺距; θ 是角距离, x 是径向坐标, 对同一螺旋线 x, θ 不是相互独立量, 即 $x = \frac{\theta}{2\pi}x_0, \gamma = \frac{\beta}{2\pi}x_0, k_0, \chi_1, \chi_2, \omega_0, \omega_1$ 是相关的

力学常数.

3. 耦合的非线性微分方程组的行波精确解组

对(1)式作行波变换, 设 $\xi = x - vt$, 并令

$$\begin{cases} \varphi_1(x, t) = f_1(\xi) e^{ikx - \omega t} \\ \varphi_2(x, t) = f_2(\xi) e^{ikx - \omega t} \end{cases}, \quad (2) \quad \frac{\partial R(x, t)}{\partial x} = \frac{\partial R(\xi)}{\partial \xi} = \frac{\alpha \omega_0}{\gamma_0} (|f_1(\xi)|^2 + |f_2(\xi)|^2)$$

将(2)式代入(1)式并化简得: $\nu = 2\Omega k$,

$$\begin{cases} \omega f_1(\xi) - s f_1(\xi) - c f_1(\xi) (|f_1(\xi)|^2 + |f_2(\xi)|^2) - \Omega k^2 \frac{d^2 f_1(\xi)}{d\xi^2} = 0, \\ \omega f_2(\xi) - s f_2(\xi) - c f_2(\xi) (|f_1(\xi)|^2 + |f_2(\xi)|^2) - \Omega k^2 \frac{d^2 f_2(\xi)}{d\xi^2} = 0. \end{cases} \quad (3)$$

(3)式中, $c = \frac{h\gamma_0^2(\chi_1 + \chi_2)}{2\omega_0^2 M(\nu^2 - \nu_0^2)}$, $\Omega = \frac{\omega_1^2 \gamma_0^2}{4\omega_0}$, 声速为 $\nu_0 = \sqrt{\frac{h\gamma_0^2}{M}}$, $s = \left(\omega_0 - \frac{\omega_1^2}{2\omega_0}\right)$, ν 和 ω 分别是行波的传输速度和传输频率.

度和传输频率.

为了得到耦合解组,用 Maple 程序直接求解(3)式得,

$$\text{解组 1: } \begin{cases} f_1(\xi) = 0, \\ f_2(\xi) = \text{Rootof} \left[\pm 2 \int^z \frac{\Omega}{\sqrt{-2\Omega - 2f^2 k^2 \Omega + 2f^2 \omega - 2f^2 s - 2f^4 c - 2C_1 \Omega}} df + \xi + C_2 \right]; \end{cases} \quad (4)$$

$$\text{解组 2: } \begin{cases} f_2(\xi) = 0, \\ f_1(\xi) = \text{Rootof} \left[\pm 2 \int^z \frac{\Omega}{\sqrt{-2\Omega - 2f^2 k^2 \Omega + 2f^2 \omega - 2f^2 s - 2f^4 c - 2C_1 \Omega}} df + \xi + C_2 \right]; \end{cases} \quad (5)$$

$$\text{解组 3: } \begin{cases} a = f_1(\xi) \left(b(a) = \frac{df_1(\xi)}{d\xi} \right), \\ f_2(\xi) = \pm \frac{\sqrt{ca(-ca^3 - as + a\omega - ak^2 \Omega + \Omega \left[\frac{\partial}{\partial a} b(a) \right] a(b))}}{ca}. \end{cases} \quad (6)$$

解组 3 存在 a 对 $b(a)$ 的约束条件方程(注:约束条件方程表达式很繁杂,为了减少篇幅,不在文中列出,有兴趣的读者可在 Maple 语言中欣赏).(4)式到(6)式构成(3)式的行波精确解组,它们涵盖了所有的耦合解组与非耦合解组,具有任意性,有下述特征:

①(2)式中,取 $\varphi_1(x, t)$, $\varphi_2(x, t)$ 对应的行波参数为 $k_1 a_1$, ω_1 和 $k_2 a_2$, ω_2 , 由约束条件方程可得耦合的行波解组(6)式的相速、波速完全相同,即 $(k_1 a_1)^2 = (k_2 a_2)^2$, $\omega_1 = \omega_2$, 故在(2)式中取 $k_1 a_1 = k_2 a_2 = k$, $\omega_1 = \omega_2 = \omega$;

② 解组 1 和解组 2 的表达式中, f 是任意函数或任意函数变量, Z 是任意积分区域, C_1 , C_2 是积分常数,选定它们后,得到非线性 Schrödinger 方程的行波的孤立子解;

③ 解组 1 和解组 2 是方程组(3)式即非线性微分方程组的非耦合的行波孤立子解,也是 $\varphi_1(x, t)$ 和 $\varphi_2(x, t)$ 所在方程(1)分别以对方解为零而退化

为非线性 Schrödinger 方程的行波孤立子解组^[3-6,8],它们具有 NLS 方程解的特征,其特性可查阅相关的非线性理论^[9];

④ 解组 3 是方程组(3)即非线性 Schrödinger 方程组(1)的耦合的行波解组,反应了 α 螺旋蛋白质螺旋链运动模型的耦合效用,它们满足归一化条件,其中 a 是任意函数或任意函数变量, $b(a)$ 是 a 的任意函数.

4. 算例函数及其特性分析

4.1. 算例函数

取 $a = f_1(\xi) = \sqrt{\frac{1}{2}} d_1 \text{sech}(d_1 \xi)$, 代入(6)式和(2)式得到 α 螺旋蛋白质螺旋链运动模型的耦合的行波孤立子精确解组.

$$b(a) = \frac{\sqrt{2}}{2} d_1^{3/2} \text{sech}(d_1 \xi) \tanh(d_1 \xi), \quad (7)$$

$$\left\{ \begin{aligned} \varphi_1(x, t) &= f_1(\xi) e^{(kx - \omega t)} = \sqrt{\frac{1}{2}} d_1 \operatorname{sech}(d_1 \xi) e^{(kx - \omega t)}, \\ \varphi_2(x, t) &= f_2(\xi) e^{(kx - \omega t)} = \pm \frac{c \sqrt{\frac{1}{2}} d_1 \operatorname{sech}(d_1 \xi) \left((\omega - s - k^2 \Omega) \sqrt{\frac{1}{2}} d_1 \operatorname{sech}(d_1 \xi) \right.}{c \sqrt{\frac{1}{2}} d_1 \operatorname{sech}(d_1 \xi)} \left. - c \left(\frac{1}{2} d_1 \right)^{3/2} \operatorname{sech}^3(d_1 \xi) + \frac{1}{2} \Omega d_1^{5/2} (\cosh^2(d_1 \xi) - 2) \right)}{c \sqrt{\frac{1}{2}} d_1 \operatorname{sech}(d_1 \xi)} e^{(kx - \omega t)} \end{aligned} \right. \quad (8)$$

(8)式构成完闭的耦合解组算例函数(以下简称“算例函数”),由归一化条件得:

$$d_1 = \pm \frac{\sqrt{\Omega s - \omega + k^2 \Omega}}{\Omega}, \quad c = \mp 2 \sqrt{\Omega s - \omega + k^2 \Omega}.$$

4.2. 参变量变化下算例函数 $\varphi_1(x, t)$ 和 $\varphi_2(x, t)$ 的特性

分析(8)式可得,影响算例函数 $\varphi_1(x, t)$ 和 $\varphi_2(x, t)$ 变化的独立参变量有3个,它们是比例系数 Ω 、行波传输速度 v 和传输频率 ω 。运用 Maple 程序分析,得到下列3个独立参变量变化所引起的算例函数 $\varphi_1(x, t)$ 和 $\varphi_2(x, t)$ 的变化特性。

表1 取 $v = 100 \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$, $\omega = 150\pi$, Ω 变化下算例函数 $\varphi_1(x, t)$ 和 $\varphi_2(x, t)$ 特性1

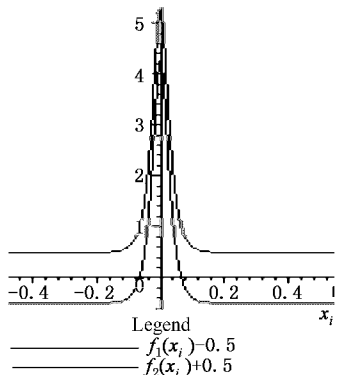
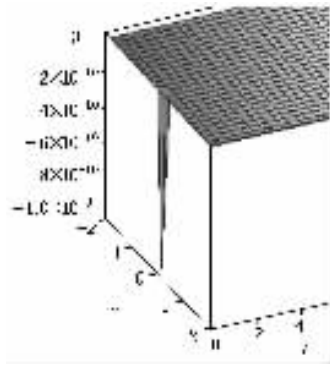
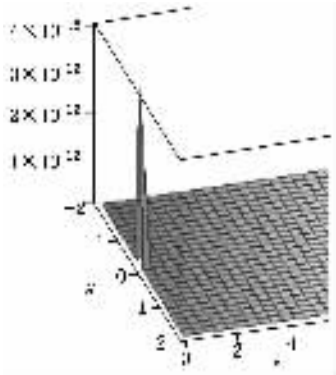
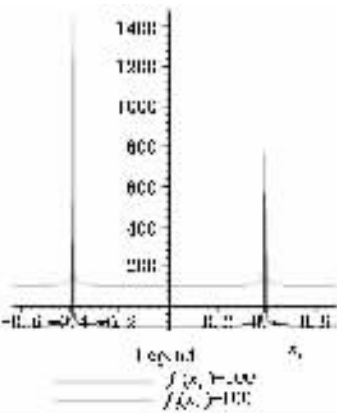
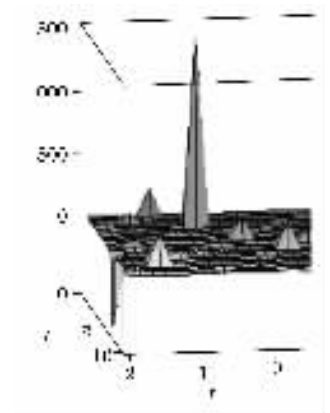
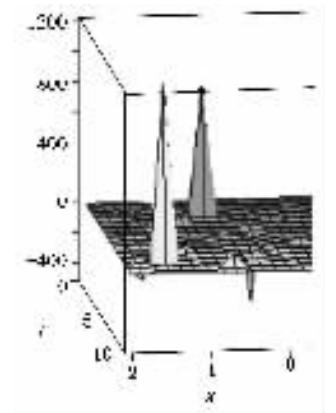
算例函数取值及其行波特征	$ f_1(\xi) $ 和 $ f_2(\xi) $ 模图	$\operatorname{Re}(\varphi_1 - \varphi_2)$ 三维图	$\ln \varphi_1 - \varphi_2 $ 三维图
<p>Ω 变化区间: $[0, 5.491]$; 函数取值: $v = 100 \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$, $\omega = 150\pi$, $\Omega = 1$; 行波特征: 单孤立子</p>			
<p>Ω 变化区间: $(5.491, \infty]$; 函数取值: $v = 100 \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$, $\omega = 150\pi$, $\Omega = 7.5$; 行波特征: 多孤立子</p>			

表 2 取 $\nu = 100\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$, $\Omega = 4$, ω 变化下算例函数 $\varphi_1(x, t)$ 和 $\varphi_2(x, t)$ 特性 2

算例函数
取值及其孤波
特征

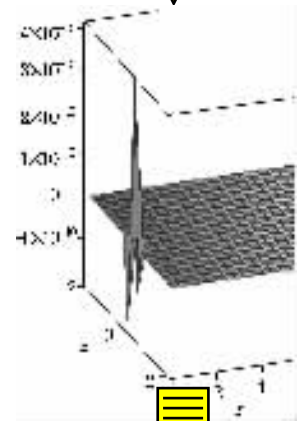
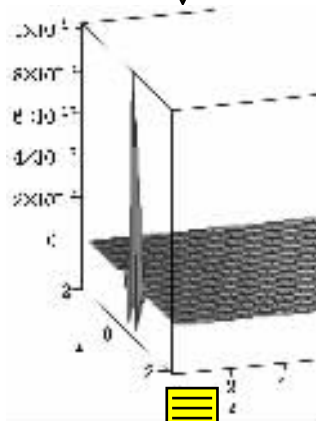
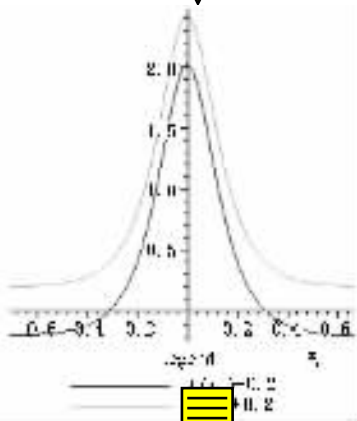
算例函数 $\varphi_1(x, t)$ 和 $\varphi_2(x, t)$ 特性 2

$|f_1(\xi)|$ 和 $|f_2(\xi)|$

$\text{Re}(\varphi_1 - \varphi_2)$

$\text{Im}(\varphi_1 - \varphi_2)$

ω 变化区间: $[0, 295.4\pi)$; 函数取值:
 $\nu = 100\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$, $\Omega = 4$, $\omega = 80\pi$; 行波特征: 单孤立子.



ω 变化区间:
 $(294.5\pi, \infty]$; 函数
取值: $\nu = 100\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$,
 $\Omega = 4$, $\omega = 400\pi$; 行
波特征: 多孤立子

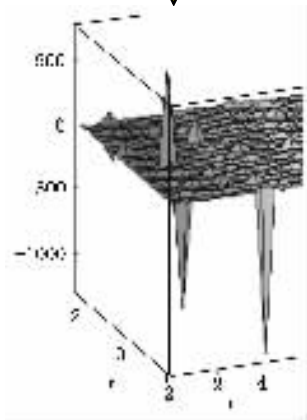
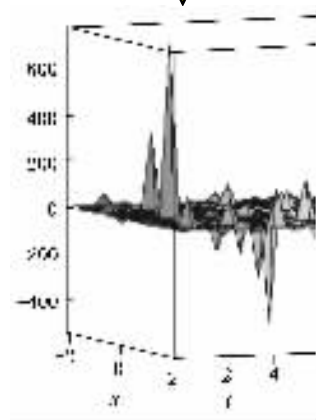
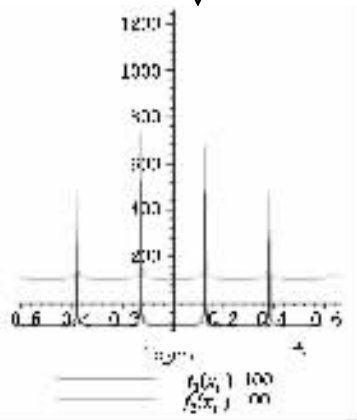


表 3 取 $\Omega = 4$, $\omega = 150\pi$, ν 变化下算例函数 $\varphi_1(x, t)$ 和 $\varphi_2(x, t)$ 特性 3

算例函数
取值及其孤波
特征

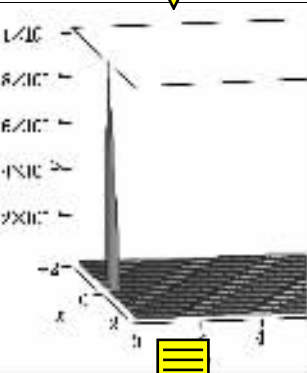
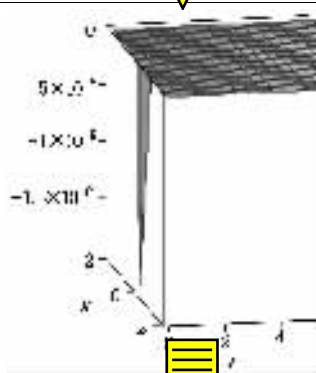
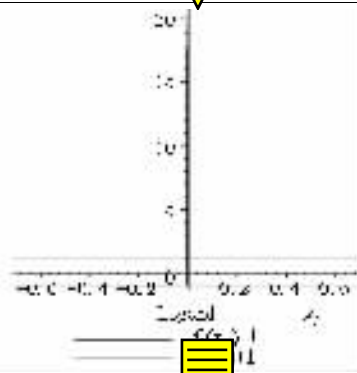
算例函数 $\varphi_1(x, t)$ 和 $\varphi_2(x, t)$ 特性 3

$|f_1(\xi)|$ 和 $|f_2(\xi)|$

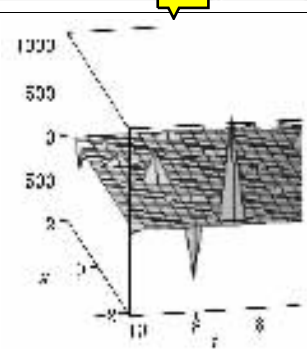
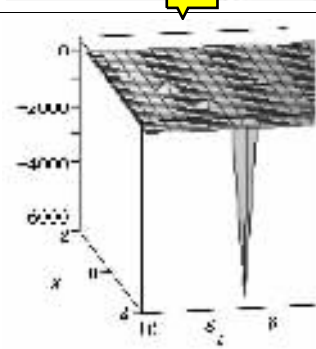
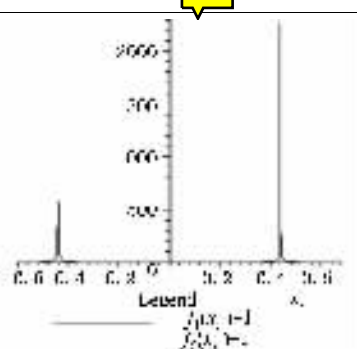
$\text{Re}(\varphi_1 - \varphi_2)$

$\text{Im}(\varphi_1 - \varphi_2)$

ν 变化区间:
 $\begin{cases} 0-3.4 \\ 85.09-\infty \\ -88.49-\infty \end{cases}$
函数取值: $\Omega = 4$, $\omega = 150\pi$, $\nu = -7400$;
行波特征: 单孤立子



ν 变化区间:
 $\begin{cases} 3.4-85.09 \\ -88.49-0 \end{cases}$;
函数取值: $\Omega = 4$, $\omega = 150\pi$, $\nu = 80$; 行波
特征: 多孤立子



4.2.1. 算例函数 $\varphi_1(x, t)$ 和 $\varphi_2(x, t)$ 的特性表说明

1) 算例函数特性参数选择

$$d_1 = +\frac{\sqrt{\Omega(s - \omega + k^2\Omega)}}{\Omega}, \quad c = -2\sqrt{\Omega(s - \omega + k^2\Omega)};$$

2) 由于 $|\varphi_1(x, t)| = |f_1(\xi)|$, $|\varphi_2(x, t)| = |f_2(\xi)|$, 算例函数模图用 $|f_1(\xi)|$ 和 $|f_2(\xi)|$ 值代替 $|\varphi_1(x, t)|$ 和 $|\varphi_2(x, t)|$ 值; 3) 在 Maple 作图中, 采用了 $x_i = \xi = x - vt$, $f_1(\xi) = f_1(x_i)$, $f_2(\xi) = f_2(x_i)$ 的默认形式; 4) 算例函数模图、实部图和虚部图坐标的上下移动及其参变量坐标 (x_i, x, t) 区间的选择是任意的.

4.2.2. 算例函数 $\varphi_1(x, t)$ 和 $\varphi_2(x, t)$ 特性分析

1) 不管 3 个独立参变量如何变化, 也不管 $\varphi_1(x, t)$ 和 $\varphi_2(x, t)$ 是单孤立子解还是多孤立子解, 算例函数模值都近似相等, 研究表明, $|f_1(\xi)| - |f_2(\xi)|$ 差变化范围是: 单孤立子在 10^{-8} 到 10^{-20} 数量级之间, 多孤立子在 10^{-6} 到 10^{-9} 数量级之间; 2) 单孤立子峰值远远小于多孤立子峰值, 孤波宽度只对单孤立子讨论才有意义; 3) 可通过控制 α 螺旋蛋白质内部比例系数 Ω , 行波传输速度 v 和传输频率 ω 变化来稳定或改变孤立子解; 4) 表 2 中, 行波传输频率 $\omega \rightarrow 0$ 时, 孤波宽度, 峰值稳定在 1.04, 2.5 附近; 5) 表 3 中, 当 $v = (\pm 6000 - \pm \infty)$ 和 $(0.006 - 0)$, 单孤立子宽度 $\Delta\xi \rightarrow 0$, 其中, 在 $v = (\pm 11020 - \pm 14310)$ 区域, $|\varphi_1| = |\varphi_2| \rightarrow (20)_{\max}$, 当 $v \rightarrow \pm \infty$, $|\varphi_1| = |\varphi_2| \rightarrow 0$, 且实部、虚部差值不同; 6) 算例函数特性图表示, $\varphi_1(x, t)$ 和 $\varphi_2(x, t)$ 单孤立子解的实部、虚部差值在 10^{-8} 到 10^{-32} 数量级之间, 可忽略不计, 但多孤立子解的实部、虚部差值同它们对应的模值的数量级接近, 计算时不能忽略不计; 7) 研究表明, 算例函数 $\varphi_1(x, t)$ 和 $\varphi_2(x, t)$ 特性表的 3 个独立参变量紧密联系, ω 和 v (或 ω 和 Ω 或 v 和 Ω) 固定值

的选择, 影响 Ω (或 v 或 ω) 的单孤立子解和多孤立子解的分界区域.

5. 讨论和结束语

算例函数 $\varphi_1(x, t)$ 和 $\varphi_2(x, t)$ 特性分析表明:

1) 要增加、稳定和控制 α 螺旋蛋白质的活性和能量传输功能, 可通过调节其内部比例系数 Ω , 行波传输速度 v 和传输频率 ω , 使其在多孤立子状态下运动; 2) 可以预测, 当外界条件使得具有螺旋链结构的生物大分子的两条链上的传输能量、动量不相等时, 生物大分子可以通过自身的内部调节, 最终使两条链上的传输能量、动量相等后达到同量传输; 3) 由于 $\varphi_1(x, t)$ 和 $\varphi_2(x, t)$ 的波速、相速、频率相同, 单孤立子的形状、峰值相同, 多孤立子的形状、峰值不完全相同, 在质量、构架上完全相同的大分子螺旋链运动模型, 其孤立子解具有耦合效应, 即螺旋链的两个孤立子波在运动过程中是有机的组合, 具有生命力, 从而会加速加剧 ATP 水解所释放的能量或动物肌肉收缩现象. 在外界条件不改变情况下, 同一分子链上相同的时间区域不同的空间区域, 其 ATP 水解过程或动物肌肉收缩过程及其对外作用效果不同, 同样, 不同的时间区域相同的空间区域, 其 ATP 水解过程或动物肌肉收缩过程及其对外作用效果不同; 4) 由于 $\varphi_1(x, t)$ 和 $\varphi_2(x, t)$ 是对称性很好的两个孤立子波, 文献 [3] 得到的解不是方程组 (3) 式的非碰撞解, 而是耦合解组的特殊算例.

受 Maple 语言运算程序的影响, 得到的约束条件方程很难化简, 也限制了算例解的函数形式选择 (研究表明, 算例解只能选择具有归一化性质的函数形式). 我们坚信, 随着数学用计算机程序的开发, 算例解的函数形式选择会多样化.

- [1] Davydov A S 1979 *Solitons in Molecular Phys. Scr.* **20** 387
 [2] Scott A C 1991 *Physica D* **5** 333
 [3] Wu G M and Zhou L Y 1995 *Acta Mathematica Scientia* **17** 18 (in Chinese) [吴光敏、周凌云 1995 数学物理学报 **17** 18]
 [4] Chen L L and Zhou L Y 1996 *Journal of Kunming University of Science and Technology* (Science and Technology) **21** 85 (in Chinese) [陈丽丽、周凌云 1996 昆明理工大学学报 **21** 3 p85]
 [5] Wu G M 1995 *Journal of Kunming Institute of Technology* **20** 64 (in Chinese) [吴光敏 1995 昆明理工大学学报 **20** 64]
 [6] Ruan H Y and Li H J 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 996 (in Chinese)

- [阮航宇、李慧军 2005 物理学报 **54** 996]
 [7] Pu L C, Zhang X F and Xu L J 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 209 (in Chinese) [蒲利春、张雪峰、徐丽君 2005 物理学报 **54** 209]
 [8] Zhang J F, Xu C Z and He B G 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2652 (in Chinese) [张解放、徐昌智、何宝钢 2004 物理学报 **53** 2652]
 [9] Huang N N 1996 *Theory of Soliton and Method of Perturbations* (Shanghai: Shanghai Scientific and Technological Education Publishing House) pp26-29 [黄念宁 1996 孤子理论和微扰方法 (上海: 上海科技教育出版社) 第 26—29 页]

Exact solutions of nonlinear Schrödinger equations

Pu Li-Chun Lin Zong-Bing Zhang Xue-Feng Wang Ben-Ju Jiang Yi Yan Tian-Yan

(*Maths and Physics Department , Panzihua University , Panzihua 617000 , China*)

(Received 9 June 2005 ; revised manuscript received 19 June 2005)

Abstract

A Maple language process is utilized to find the traveling wave accurate solutions and their restricting condition equation for nonlinear Schrödinger equations with coupling characteristic without any assumptions. The expressions are arbitrary and cover all coupling solutions and non – coupling solutions . The calculation and characteristic analysis for the coupling solutions can explain the coupling effect of traveling wave soliton solutions of the helix chain movement model for the alpha-helix protein and reveal the direction in which the protein activation and function are increased and fixed. The research methods in this paper provide certain ways for obtaining the traveling wave accurate solutions of the coupling nonlinear differential equations.

Keywords : nonlinear Schrödinger equations , Maple language , coupling , traveling wave accurate solutions , calculation and characteristic analysis

PACC : 0230 , 0340K